

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 517.958:537.311.1; 621.315.592

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-3-355-365>

Поступила в редакцию 24.07.2019

Received 24.07.2019

Н. А. Поклонский, А. О. Бурый, Н. Г. Абрашина-Жадаева, С. А. Вырко

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь***ДИФфуЗИОННО-ДРЕЙФОВАЯ МОДЕЛЬ МИГРАЦИИ ИОНОВ
ПО МЕЖДОУЗЛИЯМ ДВУМЕРНОЙ РЕШЕТКИ**

Аннотация. Проведено аналитическое и численное моделирование процесса получения из молекул воды гидроксильных радикалов OH^\bullet и атомарного водорода H^\bullet на электродах к квадратной двумерной решетке, основанного на электрической нейтрализации ионов OH^- на аноде и ионов H^+ – на катоде. Рассмотрено численное решение системы уравнений, описывающих стационарную миграцию ионов H^+ и OH^- по междоузлиям квадратной решетки, находящейся во внешнем электрическом поле. Ионы H^+ и OH^- в междоузлиях квадратной решетки генерируются при распаде молекулы воды под действием внешнего электромагнитного излучения и внешнего постоянного (стационарного) электрического поля. Считается, что анод и катод являются неограниченными стоками ионов. Из-за нелинейности уравнений задача решается с помощью разностной аппроксимации для исходной системы дифференциальных уравнений с построением итерационного процесса. Расчетным путем показано, что зависимость ионного тока от разности электрических потенциалов между анодом и катодом является сублинейной.

Ключевые слова: прыжковая миграция ионов, диффузионно-дрейфовая модель, двумерная решетка, гидроксильный радикал, атомарный водород

Для цитирования. Диффузионно-дрейфовая модель миграции ионов по междоузлиям двумерной решетки / Н. А. Поклонский [и др.] // Вест. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2019. – Т. 55, № 3. – С. 355–365. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-3-355-365>

N. A. Poklonski, A. O. Bury, N. G. Abrashina-Zhadaeva, S. A. Vyrko

*Belarusian State University, Minsk, Belarus***DIFFUSION-DRIFT MODEL OF ION MIGRATION
OVER INTERSTITIAL SITES OF A TWO-DIMENSIONAL LATTICE**

Abstract. An analytical and numerical modeling of the process of obtaining hydroxyl radicals OH^\bullet and atomic hydrogen H^\bullet from water molecules on a square lattice based on electrical neutralization of ions OH^- on an anode and ions H^+ on a cathode is conducted. The numerical solution of a system of equations describing a stationary migration of ions H^+ and OH^- over the interstitial sites of a square lattice located in an external electric field is considered. The ions H^+ and OH^- in the interstitial sites of a square lattice are generated as a result of dissociation of a water molecule under the action of external electromagnetic radiation and external constant (stationary) electric field. It is assumed that anode and cathode are unlimited ion sinks. The problem is solved using the finite difference approximation for the initial system of differential equations with the construction of an iterative process due to the nonlinearity of the constituent equations. It is shown by using calculation that the dependence of the ion current on a difference of electric potentials between anode and cathode is sublinear.

Keywords: hopping ion migration, diffusion-drift model, two-dimensional lattice, hydroxyl radical, atomic hydrogen

For citation. Poklonski N. A., Bury A. O., Abrashina-Zhadaeva N. G., Vyrko S. A. Diffusion-drift model of ion migration over interstitial sites of a two-dimensional lattice. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2019, vol. 55, no. 3, pp. 355–365 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-3-355-365>

Введение. Электрически нейтральные гидроксильные радикалы (OH^\bullet) *in vivo* имеют высокую реакционную способность [1, 2], что делает их пригодными для дезинфекции медицинских инструментов и помещений [3].

Одним из возможных методов получения радикалов OH^\bullet из потока водяного пара является метод нейтрализации анионов OH^- на аноде, а катионов H^+ – на катоде электрического конденсатора из двух монослоев графена [4]. Для оценки эффективности этого процесса рассмотрим задачу о миграции по междоузлиям двумерной решетки ионов H^+ и OH^- , получаемых при диссоциации молекул H_2O . Известны модели миграции монополярных ионов, т. е. имеющих заряды одного знака, вдоль двумерной решетки [5, 6] или сквозь тонкие мембраны [7–9] без учета их генерации и рекомбинации.

Цель работы – исследовать миграцию ионов H^+ и OH^- (имеющих заряд $+e$ и $-e$, где e – элементарный заряд) по междоузлиям двумерной плоской квадратной решетки, подключенной к аноду и катоду электрической цепи со стационарным ионным током. При этом учитывается как их рекомбинация с образованием молекулы H_2O , так и их генерация при диссоциации H_2O . В работе рассмотрен стационарный процесс совместной миграции анионов и катионов по междоузлиям квадратной решетки.

Особым свойством воды является образование в ней водородных связей между молекулами, что позволяет воде находиться в жидком состоянии при нормальных условиях и делает возможной жизнь на Земле [10, 11]. Величина дипольного момента молекулы воды $\approx 0,74ea_0$, где e – элементарный заряд, a_0 – боровский радиус. При наложении внешнего электрического поля дипольный момент молекулы воды ориентируется в междоузлиях решетки по направлению напряженности поля. При достаточно сильном внешнем электрическом поле (и подсветке) молекула H_2O в решетке распадается на ионы H^+ и OH^- . Ионы OH^- мигрируют к аноду, электрически нейтрализуются там, превращаясь в гидроксильный радикал OH^0 , и покидают решетку. Ионы H^+ мигрируют к катоду, электрически нейтрализуются там, превращаясь в H^0 , а затем в молекулы H_2 , и покидают решетку.

Постановка задачи. Рассмотрим миграцию ионов OH^- и H^+ в двумерной решетке. Для определенности будем рассматривать прямоугольный фрагмент решетки с ребром квадратной элементарной ячейки R , в некоторых междоузлиях которой находятся одиночные молекулы воды или ионы OH^- и H^+ при комнатной температуре (рис. 1). Концентрация молекул H_2O определяется внешним источником молекулярного пара. К сторонам решетки длиной L и толщиной $d = R$ подключены два электрода (анод с координатой $x = 0$ и катод с координатой $x = L$), между которыми от внешнего источника электрической энергии создается разность электрических потенциалов U , а также подсветка, вызывающая фотодиссоциацию молекул H_2O на ионы OH^- и H^+ .

При достаточно сильном внешнем электрическом поле или при поглощении света (с энергией фотона, достаточной для диссоциации) молекула H_2O распадается на ионы H^+ и OH^- . Мигрируя по решетке, эти ионы достигают электродов, где происходит их электрическая нейтрализация и последующее выделение в виде двух газов OH^0 и H_2 . Отметим, что разность электрических потенциалов между анодом и катодом должна выбираться умеренной, чтобы не происходило распространения электрического разряда по поверхности решетки (см., например, [12]).

В диффузионно-дрейфовом приближении [13, 14] рассмотрим миграцию двух типов ионов вдоль оси x по междоузлиям плоской двумерной квадратной решетки (см. рис. 1). Считаем, что

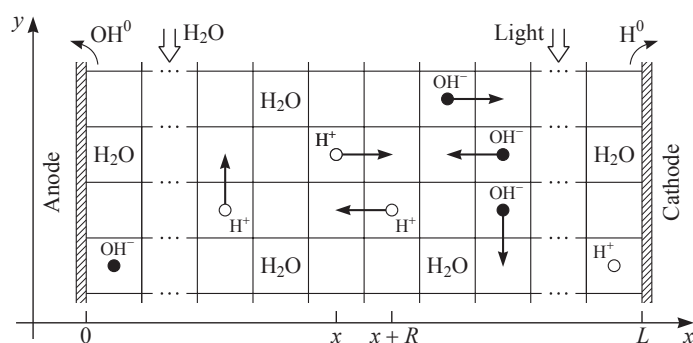


Рис. 1. Схема плоской двумерной квадратной решетки, содержащей в междоузлиях электрически нейтральные молекулы H_2O , ионы H^+ и OH^- . Решетка расположена между двумя плоскими электродами (заштрихованы). Стрелками показаны направления перескоков ионов в решетке на плоскости xy . Широкими стрелками показаны поток молекул воды на решетку и их фотовозбуждение от внешних источников. Длина каждого прыжка иона равна R ; толщина решетки $d = R$; расстояние между электродами $L \gg R$

Fig. 1. Scheme of a flat two-dimensional square lattice containing electrically neutral H_2O molecules, ions H^+ and OH^- in the interstitial sites. The lattice is located between two flat electrodes (hatched). The arrows indicate the directions of ion hops in the lattice on the xy plane. The wide arrows show the flow of water molecules to the lattice and their photoexcitation from the external sources. The length of each ion hop is equal to R ; the lattice thickness $d = R$; the electrode distance $L \gg R$

молекулы H_2O находятся в междоузлиях решетки. Мигрируют по междоузлиям только ионы OH^- и H^+ , которые возникают в междоузлиях при распаде молекулы воды ($\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH}^- + \text{H}^+$) и порождают молекулу воды при слиянии ($\text{OH}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{O}$). Отметим, что вследствие того, что молекула H_2O может распадаться на ионы OH^- и H^+ , а образовавшиеся ионы OH^- и H^+ могут рекомбинировать с образованием H_2O , расположение электронейтральных молекул воды изменяется, они как бы «мигрируют» по междоузлиям решетки, но скачкообразно.

Далее все концентрации (междоузлий, молекул H_2O и ионов) рассчитываются как объемные, так как двумерная решетка имеет конечную толщину d . Пусть $N_t = 1/R^2 d = R^{-3}$ – объемная концентрация всех междоузлий в двумерной квадратной решетке, N_{im} – объемная концентрация междоузлий, заполненных как молекулами H_2O с концентрацией N_0 , так и ионами H^+ и OH^- (фрагментами молекулы H_2O) с концентрациями N_{+1} и N_{-1} . В термодинамическом равновесии (обозначается индексом «eq»), т. е. в отсутствие ионного тока, разности электрических потенциалов между анодом и катодом, а также подсветки, имеем

$$N_{\text{im}} = N_{-1} + N_0 + N_{+1} = (N_{\text{im}})_{\text{eq}}; \quad N_{-1} = N_{+1}, \quad (1)$$

где $N_{-1} = (N_{-1})_{\text{eq}}$, $N_0 = (N_0)_{\text{eq}}$, $N_{+1} = (N_{+1})_{\text{eq}}$ – концентрация междоузлий решетки, занятых OH^- , H_2O и H^+ соответственно, не зависит от координаты x ; $(N_t - N_{\text{im}})/N_t = P_{\text{eq}} < 1$ – доля свободных (незанятых молекулами H_2O или ионами OH^- и H^+) междоузлий.

Пусть в решетке электрическое поле напряженностью $E_x = -d\phi/dx$ направлено вдоль оси x (вдоль ребра квадратной решетки) от анода к катоду; $\phi(x)$ – электрический потенциал; $U = \phi(0) - \phi(L)$ – разность электрических потенциалов между анодом и катодом. Далее рассматриваются лишь прыжки ионов в соседние свободные междоузлия решетки вдоль осей x или y . Также учитывается, что величину плотности ионного тока определяют прыжки только вдоль оси x . Прыжки ионов вдоль оси y не изменяют равновесного (равномерного) распределения ионов вдоль оси y . Таким образом, задача описания миграции ионов OH^- и H^+ в квадратной решетке становится одномерной.

Следуя схеме получения выражения для прыжкового тока электронов между водородоподобными донорами в зарядовых состояниях (0) и (+1) в трехмерном кристаллическом полупроводнике n -типа [15], запишем выражение для стационарной плотности прыжкового тока $J_{-1}(x)$ ионов OH^- с зарядом $-e < 0$ по междоузлиям квадратной решетки в виде

$$J_{-1}(x) = -e N_{-1}(x) \frac{N_t - N_{\text{im}}}{N_t} R \Gamma_{-1}(x; x+R) + e N_{-1}(x+R) \frac{N_t - N_{\text{im}}}{N_t} R \Gamma_{-1}(x+R; x), \quad (2)$$

где e – элементарный заряд, $P = P_{\text{eq}} = (N_t - N_{\text{im}})/N_t$ – доля междоузлий в решетке, свободных и от молекул, и от ионов; R – длина прыжка иона между соседними междоузлиями, $\Gamma_{-1}(x; x+R)$ – частота прыжков (число прыжков в единицу времени) ионов OH^- из междоузлий с координатой x и потенциалом $\phi(x)$ в междоузлия с координатой $x+R$ и потенциалом $\phi(x+R)$; $\Gamma_{-1}(x+R; x)$ – частота прыжков ионов OH^- в обратном направлении оси x .

Для дальнейших преобразований необходимо разложить величины $N_{-1}(x+R)$ и $\Gamma_{-1}(x+R; x) - \Gamma_{-1}(x; x+R)$ в формуле (2) в ряд Тейлора в точке x по степеням R .

Ограничившись линейными (по производным) слагаемыми, получим:

$$N_{-1}(x+R) \approx N_{-1}(x) + \frac{dN_{-1}(x)}{dx} R, \\ \Gamma_{-1}(x+R; x) - \Gamma_{-1}(x; x+R) \approx \frac{d\Gamma_{-1}}{dx} R = \frac{d\Gamma_{-1}}{d\phi} \frac{d\phi}{dx} R = -\frac{d\Gamma_{-1}}{d\phi} E_x R > 0, \quad (3)$$

где $E_x = -d\phi/dx$ – напряженность электрического поля в решетке.

Подставляя (3) в (2) и ограничившись только линейными (по производным) слагаемыми, получим

$$J_{-1}(x) = -e N_{-1}(x) P E_x R^2 \frac{d\Gamma_{-1}}{d\phi} + e P R^2 \frac{(\Gamma_{-1})_{\text{eq}}}{2} \frac{dN_{-1}(x)}{dx}, \quad (4)$$

где $[\Gamma_{-1}(x+R; x)]_{\text{eq}} = [\Gamma_{-1}(x; x+R)]_{\text{eq}} = (\Gamma_{-1})_{\text{eq}}/2$ – частота прыжков ионов OH^- по междоузлиям решетки в одном из четырех возможных направлений на плоскости xu (см. рис. 1) в термодинамическом равновесии.

Введем по аналогии с прыжковой миграцией электронов по водородоподобным донорам в полупроводнике дрейфовую прыжковую подвижность M_{-1} и коэффициент прыжковой диффузии D_{-1} иона OH^- по междоузлиям решетки:

$$M_{-1} = -PR^2 \frac{d\Gamma_{-1}}{d\varphi} > 0; \quad D_{-1} = \frac{1}{2} PR^2 (\Gamma_{-1})_{\text{eq}} > 0. \quad (5)$$

С учетом (5) выражение (4) дает стационарную плотность прыжкового тока $J_{-1}(x)$ ионов OH^- по междоузлиям квадратной решетки в виде

$$J_{-1}(x) = e N_{-1}(x) M_{-1} E_x + e D_{-1} \frac{dN_{-1}(x)}{dx}, \quad (6)$$

где $N_{-1}(x)$ – концентрация ионов OH^- в решетке, $E_x = -d\varphi/dx$ – напряженность электрического поля в решетке, $\varphi(x)$ – электрический потенциал.

Следуя схеме получения выражения для прыжкового тока дырок между водородоподобными акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (–1) в трехмерном кристаллическом полупроводнике p -типа [16], запишем выражение для стационарной плотности прыжкового тока $J_{+1}(x)$ ионов H^+ по междоузлиям квадратной решетки по аналогии с (2) в виде

$$J_{+1}(x) = e N_{+1}(x) \frac{N_t - N_{\text{im}}}{N_t} R \Gamma_{+1}(x; x+R) - e N_{+1}(x+R) \frac{N_t - N_{\text{im}}}{N_t} R \Gamma_{+1}(x+R; x), \quad (7)$$

где $\Gamma_{+1}(x; x+R)$ – частота прыжков ионов H^+ из междоузлий с координатой x и потенциалом $\varphi(x)$ в междоузлия с координатой $x+R$ и потенциалом $\varphi(x+R)$; $\Gamma_{+1}(x+R; x)$ – частота прыжков ионов H^+ в обратном направлении оси x .

Аналогично (5) введем дрейфовую прыжковую подвижность M_{+1} и коэффициент прыжковой диффузии D_{+1} иона H^+ в виде

$$M_{+1} = -PR^2 \frac{d\Gamma_{+1}}{d\varphi} > 0; \quad D_{+1} = \frac{1}{2} PR^2 (\Gamma_{+1})_{\text{eq}} > 0, \quad (8)$$

где $(\Gamma_{+1})_{\text{eq}}$ – равновесная частота прыжков ионов H^+ по междоузлиям решетки в обоих направлениях оси x или оси y (см. рис. 1).

В итоге аналогично (6) выражение (7) с учетом (8) для стационарной плотности прыжкового тока ионов H^+ с зарядом $+e > 0$ по междоузлиям в квадратной решетке принимает вид

$$J_{+1}(x) = e N_{+1}(x) M_{+1} E_x - e D_{+1} \frac{dN_{+1}(x)}{dx}, \quad (9)$$

где $N_{+1}(x)$ – концентрация ионов H^+ в решетке, E_x – напряженность электрического поля.

Пусть концентрация заполненных междоузлий N_{im} в решетке поддерживается постоянной внешним источником водяного пара, так что N_{im} не зависит от x . Следовательно, в задаче имеется пять неизвестных: $N_{-1}(x)$, $N_{+1}(x)$, $E_x(x) = -d\varphi(x)/dx$, $J_{-1}(x)$, $J_{+1}(x)$. Соответственно необходимо записать еще три уравнения. Для этого дополнительно к уравнениям (6), (9) учтем уравнение непрерывности $\text{div}[J_{-1}(x) + J_{+1}(x)] = \text{div} J_i = 0$ для полного стационарного ионного тока. Запишем уравнения непрерывности для плотностей ионных токов $J_{-1}(x)$ и $J_{+1}(x)$ порознь:

$$\begin{aligned} \frac{1}{e} \frac{d}{dx} J_{-1}(x) &= -\beta N_0(x) (N_t - N_{\text{im}}) + \alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x), \\ \frac{1}{e} \frac{d}{dx} J_{+1}(x) &= \beta N_0(x) (N_t - N_{\text{im}}) - \alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x), \end{aligned} \quad (10)$$

где α – скорость рекомбинации ионов H^+ и OH^- в междоузлиях решетки с образованием молекулы H_2O (число актов рекомбинации ионов в единице объема за единицу времени); β – скорость генерации из нейтральной молекулы H_2O двух ионов H^+ и OH^- в соседних междоузлиях (число актов генерации ионов в единице объема за единицу времени). Размерность величин α и β есть $[cm^3/c]$. Скорость генерации β ионов определяется не только тепловыми флуктуациями решетки и внешним электрическим полем, но и дополнительной подсветкой молекул H_2O в междоузлиях решетки электромагнитным излучением [17].

Напряженность электрического поля в решетке определяется объемной плотностью нескомпенсированного заряда $\rho_{+1}(x) - \rho_{-1}(x)$ из уравнения Пуассона (см., например, [18]):

$$\frac{dE_x}{dx} = -\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{1}{\varepsilon_r \varepsilon_0} [\rho_{+1}(x) - \rho_{-1}(x)] = \frac{e}{\varepsilon_r \varepsilon_0} [N_{+1}(x) - N_{-1}(x)], \quad (11)$$

где ε_r – относительная диэлектрическая проницаемость матрицы (двумерной решетки) с учетом вклада от молекул воды, $\varepsilon_0 = 8,85$ пФ/м – электрическая постоянная.

Отметим, что в состоянии термодинамического равновесия выполняется условие электро-нейтральности

$$(N_{-1})_{eq} = (N_{+1})_{eq} = N_{-1} = N_{+1}. \quad (12)$$

Соотношение Нернста – Таунсенда – Эйнштейна – Смолуховского между коэффициентом диффузии и дрейфовой подвижностью имеет вид [18–20]:

$$\frac{D_{-1}}{M_{-1}} = \frac{D_{+1}}{M_{+1}} = \frac{k_B T}{e}, \quad (13)$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура.

Наконец из (6), (9)–(11) составим систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} N_{-1}(x) &= \frac{1}{eD_{-1}} J_{-1}(x) + \frac{e}{k_B T} \frac{d\varphi}{dx} N_{-1}(x), \\ \frac{d}{dx} N_{+1}(x) &= -\frac{1}{eD_{+1}} J_{+1}(x) - \frac{e}{k_B T} \frac{d\varphi}{dx} N_{+1}(x), \\ \frac{1}{e} \frac{d}{dx} J_{-1}(x) &= -\beta N_0(x)(N_t - N_{im}) + \alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x), \\ \frac{1}{e} \frac{d}{dx} J_{+1}(x) &= \beta N_0(x)(N_t - N_{im}) - \alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x), \\ \frac{d^2\varphi}{dx^2} &= -\frac{e}{\varepsilon_r \varepsilon_0} [N_{+1}(x) - N_{-1}(x)], \end{aligned} \quad (14)$$

где концентрация молекул воды $N_0(x) = N_{im} - N_{-1}(x) - N_{+1}(x)$.

Дифференциальные уравнения (14) описывают миграцию ионов OH^- и H^+ по междоузлиям решетки, а также их генерацию из молекул H_2O и рекомбинацию с образованием молекулы H_2O . При получении этих уравнений принято, что доля свободных междоузлий $P = (N_t - N_{im})/N_t$ не зависит от x .

Из системы (14) можно исключить две неизвестные функции $J_{-1}(x)$ и $J_{+1}(x)$, получив систему из трех дифференциальных уравнений второго порядка. Для этого возьмем производную по координате x от 1-го и 2-го уравнений системы (14):

$$\frac{d^2}{dx^2} N_{-1}(x) = \frac{1}{eD_{-1}} \frac{d}{dx} J_{-1}(x) + \frac{e}{k_B T} \left(\frac{d^2\varphi}{dx^2} N_{-1}(x) + \frac{d\varphi}{dx} \frac{d}{dx} N_{-1}(x) \right),$$

$$\frac{d^2}{dx^2} N_{+1}(x) = -\frac{1}{eD_{+1}} \frac{d}{dx} J_{+1}(x) - \frac{e}{k_B T} \left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} N_{+1}(x) + \frac{d\phi}{dx} \frac{d}{dx} N_{+1}(x) \right). \quad (15)$$

Заменяя в (15) производные от плотностей токов $J_{-1}(x)$ и $J_{+1}(x)$ и вторую производную от электрического потенциала $\phi(x)$ по координате x соответствующими уравнениями из (14), получим не содержащую $J_{-1}(x)$ и $J_{+1}(x)$ систему трех уравнений

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} N_{-1}(x) &= \frac{1}{D_{-1}} [-\beta N_0(x)(N_t - N_{im}) + \alpha N_{-1}(x)N_{+1}(x)] + \\ &+ \frac{e}{k_B T} \left(-\frac{e}{\varepsilon_r \varepsilon_0} [N_{+1}(x) - N_{-1}(x)]N_{-1}(x) + \frac{d\phi}{dx} \frac{d}{dx} N_{-1}(x) \right); \\ \frac{d^2}{dx^2} N_{+1}(x) &= -\frac{1}{D_{+1}} [\beta N_0(x)(N_t - N_{im}) - \alpha N_{-1}(x)N_{+1}(x)] - \\ &- \frac{e}{k_B T} \left(-\frac{e}{\varepsilon_r \varepsilon_0} [N_{+1}(x) - N_{-1}(x)]N_{+1}(x) + \frac{d\phi}{dx} \frac{d}{dx} N_{+1}(x) \right); \quad \frac{d^2 \phi}{dx^2} = -\frac{e}{\varepsilon_r \varepsilon_0} [N_{+1}(x) - N_{-1}(x)]. \end{aligned} \quad (16)$$

Граничные условия электрической нейтрализации ионов H^+ и OH^- на неограниченных стоках ионов (электродах, т. е. на аноде и катоде) имеют вид (соответствует нулевой концентрации ионов на границах решетки при $x = 0$ (анод) и $x = L$ (катод)):

$$N_{-1}(0) = N_{-1}(L) = 0, \quad N_{+1}(0) = N_{+1}(L) = 0, \quad \phi(0) = U \text{ (на аноде)}, \quad \phi(L) = 0 \text{ (на катоде)}, \quad (17)$$

где L – длина двумерной решетки по оси x , U – напряжение на электродах.

Безразмерный вид системы уравнений. Для численного решения системы уравнений (16) приведем все входящие в нее величины к безразмерному виду. Введем следующие замены:

$$n_+ = \frac{N_{+1}}{N_t}, \quad n_- = \frac{N_{-1}}{N_t}, \quad \xi = \frac{x}{L}, \quad n = \frac{N_{im}}{N_t}, \quad \phi = \frac{e\phi}{k_B T}, \quad B_{\pm} = \frac{\beta N_t L^2 P}{D_{\pm 1}}, \quad A_{\pm} = \frac{\alpha N_t L^2}{D_{\pm 1}}, \quad Q = \frac{e^2 L^2 N_t}{k_B T \varepsilon_r \varepsilon_0}. \quad (18)$$

Тогда система (16) приводится к виду

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{dn_-}{d\xi} - \frac{d\phi}{d\xi} n_- \right) &= -B_- (n - n_+ - n_-) + A_- n_+ n_-, \\ \frac{d}{d\xi} \left(\frac{dn_+}{d\xi} + \frac{d\phi}{d\xi} n_+ \right) &= -B_+ (n - n_+ - n_-) + A_+ n_+ n_-, \\ \frac{d^2 \phi}{d\xi^2} &= -Q(n_+ - n_-) \end{aligned} \quad (19)$$

с граничными условиями

$$n_{\pm}|_{\xi=0} = n_{\pm}|_{\xi=1} = 0, \quad \phi|_{\xi=0} = eU/k_B T \text{ (на аноде)}, \quad \phi|_{\xi=1} = 0 \text{ (на катоде)}. \quad (20)$$

Итерационная разностная схема. Для численного решения нелинейной системы дифференциальных уравнений (19) построим итерационный процесс, линеаризующий систему для каждой итерации. Разностную схему построим аналогично работе [8]. Разобьем отрезок $[0, 1]$ оси $\xi = x/L$ на g расчетных ячеек. Обозначим сетку:

$$\omega_h = \{\xi_s = sh, s = \overline{0, g}, gh = 1\}, \quad (21)$$

где $h = 1/g$ – шаг по координате $\xi = x/L$; s – номер шага; g – число ячеек сетки. Минимальное значение $s = 0$ соответствует границе анод–решетка ($\xi_0 = 0$), максимальное значение переменной s соответствует границе решетка–катод ($\xi_g = 1$) по оси ξ .

Построим итерационную разностную схему для (19) так, чтобы каждое уравнение в ней было разрешимо только относительно одной переменной:

$$\begin{aligned} \frac{n_{-,s+1}^{(k+1)} - 2n_{-,s}^{(k+1)} + n_{-,s-1}^{(k+1)}}{h^2} - \frac{1}{h} \left(\frac{\phi_{s+1}^{(k+1)} - \phi_s^{(k+1)}}{h} \cdot \frac{n_{-,s+1}^{(k+1)} + n_{-,s}^{(k+1)}}{2} - \frac{\phi_s^{(k+1)} - \phi_{s-1}^{(k+1)}}{h} \cdot \frac{n_{-,s}^{(k+1)} + n_{-,s-1}^{(k+1)}}{2} \right) = \\ = -B_-(n - n_{-,s}^{(k+1)} - n_{+,s}^{(k)}) + A_- n_{+,s}^{(k)} \left(\frac{n_{-,s+1}^{(k+1)} + n_{-,s}^{(k+1)}}{2} \right); \\ \frac{n_{+,s+1}^{(k+1)} - 2n_{+,s}^{(k+1)} + n_{+,s-1}^{(k+1)}}{h^2} + \frac{1}{h} \left(\frac{\phi_{s+1}^{(k+1)} - \phi_s^{(k+1)}}{h} \cdot \frac{n_{+,s+1}^{(k+1)} + n_{+,s}^{(k+1)}}{2} - \frac{\phi_s^{(k+1)} - \phi_{s-1}^{(k+1)}}{h} \cdot \frac{n_{+,s}^{(k+1)} + n_{+,s-1}^{(k+1)}}{2} \right) = \\ = -B_+(n - n_{+,s}^{(k+1)} - n_{-,s}^{(k)}) + A_+ n_{-,s}^{(k)} \left(\frac{n_{+,s+1}^{(k+1)} + n_{+,s}^{(k+1)}}{2} \right); \\ \frac{\phi_{s+1}^{(k+1)} - 2\phi_s^{(k+1)} + \phi_{s-1}^{(k+1)}}{h^2} = -Q(n_{+,s}^{(k)} - n_{-,s}^{(k)}). \end{aligned} \quad (22)$$

Граничные условия (20) в разностной схеме запишем в виде (для всех k):

$$n_{\pm,0} = n_{\pm,g} = 0, \quad \phi_0 = eU/k_B T \text{ (на аноде)}, \quad \phi_g = 0 \text{ (на катоде)}. \quad (23)$$

Далее итерационный процесс реализован следующим образом: 1) полагаем $k = 0$, задаем распределение концентраций по всем узлам на данной итерации $n_-^{(k)}$ и $n_+^{(k)}$; 2) вычисляем $\phi^{(k+1)}$ из 3-го уравнения (22); 3) вычисляем $n_-^{(k+1)}$ и $n_+^{(k+1)}$ из 1-го и 2-го уравнений (22); 4) номер итерации k увеличиваем на 1; 5) пункты 2), 3) и 4) повторяем до тех пор, пока не достигнем требуемой точности.

Численные значения параметров модели. Численное решение системы уравнений (22) с граничными условиями (23) проводилось для следующих значений параметров. Расстояние между анодом и катодом равно $L = 1$ см, расстояние между ближайшими междоузлиями взято равным $R = 0,3$ нм, что примерно соответствует длине вектора трансляции большинства двумерных решеток. Толщина решетки с молекулами воды и ионами принята равной $d = R = 0,3$ нм, относительная диэлектрическая проницаемость $\epsilon_r = 2$.

Оценим энергию, необходимую, чтобы разорвать одну химическую связь Н–ОН в молекуле H_2O при комнатной температуре ($T = 300$ К). Энергия связи Н–ОН равна $E_{\text{dis}} \approx 119$ ккал/моль = $= 5,16$ эВ [21]. Такую энергию невозможно передать молекуле H_2O с помощью электрического поля в воздушной среде, поскольку необходимое значение напряженности электрического поля $E_{\text{dis}}/eb \approx 538$ МВ/см, где $b = 0,096$ нм – длина связи Н–ОН в молекуле воды, намного превышает максимально возможную напряженность электрического поля в воздухе до его пробоя при лабораторных условиях $E_{\text{max}} \approx 30$ кВ/см (см., например, [20]). При такой напряженности максимальная энергия, которая может быть передана молекуле воды, составляет $eE_{\text{max}}b \approx 0,3$ мэВ. Итак, энергия, которую можно передать молекуле H_2O от внешнего электрического поля, много меньше необходимой для диссоциации молекулы. Тепловая энергия $k_B T \approx 26$ мэВ при $T \approx 300$ К на два порядка ниже необходимой энергии для образования из H_2O ионов OH^- и H^+ . Таким образом, для того чтобы на решетке образовались ионы H^+ и OH^- из молекул H_2O при комнатной температуре, необходимо дополнительно облучать решетку с молекулами H_2O потоком фотонов с энергией фотона $\approx 5,2$ эВ (длина волны 238 нм).

Концентрация всех междоузлий решетки $N_t = 1/R^3 = 3,7 \cdot 10^{22}$ см $^{-3}$. При этом доля незанятых H_2O , H^+ и OH^- междоузлий выбирается равной $P = 0,9$, т. е. доля занятых междоузлий $N_{\text{im}}/N_t = = 0,1$. При этом значении итерационный процесс сходится.

Исходя из данных [21–23] для подвижности ионов OH^- и H^+ в воде при $T = 300$ К, примем для этих ионов на решетке

$$M_{-1} = 1 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}), \quad M_{+1} = 1 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}). \quad (24)$$

Из соотношения (13) получаем коэффициенты диффузии ионов

$$D_{-1} = 2,6 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2/\text{с}, \quad D_{+1} = 2,6 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}. \quad (25)$$

Из соотношения $D_{\pm 1} = P(\Gamma_{\pm 1})_{\text{eq}} R^2/2$, где $P = 0,9$, вычисляем частоту прыжков ионов OH^- и H^+ по решетке: $(\Gamma_{-1})_{\text{eq}} \approx 6,4 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, $(\Gamma_{+1})_{\text{eq}} \approx 6,4 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$.

Отметим, что входящие в систему уравнений (16) коэффициенты α и β связаны между собой. Действительно, в отсутствие ионного тока ($J_{-1} = J_{+1} = 0$) из уравнений (10) при учете условия электронейтральности (12) получаем соотношение между коэффициентами α и β в виде

$$\alpha = \frac{[N_{\text{im}} - (N_{-1})_{\text{eq}} - (N_{+1})_{\text{eq}}](N_t - N_{\text{im}})}{(N_{-1})_{\text{eq}}(N_{+1})_{\text{eq}}} \beta. \quad (26)$$

Скорость генерации ионов OH^- и H^+ есть произведение интенсивности падающего на решетку электромагнитного излучения на сечение фотоионизации H_2O . Скорость генерации β пар ионов есть сумма скоростей генерации за счет тепловых флуктуаций β_{th} и генерации за счет подсветки β_{lt} . Численное значение $\beta = \beta_{\text{th}} + \beta_{\text{lt}}$ выберем таким образом, чтобы при подсветке на решетке распадалось в среднем 11 % молекул H_2O . Коэффициент β является в рассматриваемой модели свободным параметром.

Для системы уравнений (16), приведенной к безразмерному виду (19), численные значения коэффициентов по (18) сильно различаются: $B_- = 1,9 \cdot 10^{24}$, $B_+ = 1,9 \cdot 10^{23}$, $A_- = 1,5 \cdot 10^{27}$, $A_+ = 1,5 \cdot 10^{26}$, $Q = 1,3 \cdot 10^{18}$. Это делает решение системы крайне чувствительным к входящим в нее параметрам. Численные расчеты проводились в пакете Wolfram Mathematica 11, который позволяет избежать ошибок округления при работе с десятичными дробями.

Результаты расчетов и обсуждение. При значениях $N_{\text{im}}/N_t = 0,1$; $P = 0,9$; $L = 1 \text{ см}$ и разности потенциалов $U = 10 \text{ В}$ получаем зависимости концентраций ионов OH^- и H^+ в решетке от координаты x , представленные на рис. 2. Видно, что концентрация ионов H^+ вблизи катода приблизительно в 10 раз меньше концентрации ионов OH^- вблизи анода, но в стационарном режиме переноса ионов в решетке скорости выделения H^0 и OH^0 на электродах одинаковы.

Зависимость потенциала ϕ от координаты x представлена на рис. 3. Как видно из рис. 3, электрический потенциал $\phi(x)$ линейно убывает слева направо (от анода к катоду), что соответствует направлению электрического поля вдоль оси x (см. рис. 1). Граничная задача с неограниченным стоком ионов соответствует нулевой концентрации ионов непосредственно на электродах, что и отражено на рис. 2. Пиковая концентрация ионов H^+ в 10 раз меньше пиковой концентрации ионов OH^- , что следует из различия их дрейфовых прыжковых подвижностей ($M_{+1}/M_{-1} = 10$) и коэффициентов прыжковой диффузии ($D_{+1}/D_{-1} = 10$). Более подвижные ионы H^+ (т. е. протоны) быстрее достигают катода и нейтрализуются. При этом пиковая концентрация менее подвижных ионов OH^- меньше концентрации занятых междоузлий $N_{\text{im}} = 0,1 N_t$ в рассматриваемой модели. Из рис. 3, а видно, что потенциал $\phi(x)$ при $U = 10 \text{ В}$ линейно убывает при увеличении расстояния x

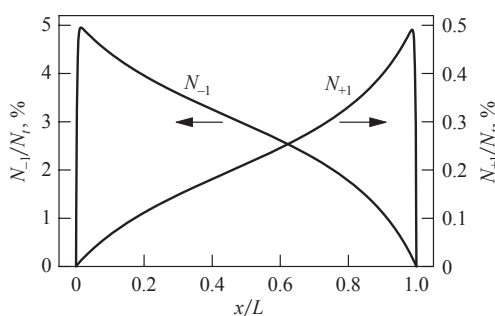


Рис. 2. Зависимости концентраций ионов OH^- (N_{-1}) и H^+ (N_{+1}) от координаты x при напряжении на электродах $U = 10 \text{ В}$ и коэффициенте генерации ионов $\beta = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^3/\text{с}$

Fig. 2. Dependences of the ion OH^- (N_{-1}) and H^+ (N_{+1}) concentrations on the x coordinate at the electrode voltage $U = 10 \text{ В}$ and the ion generation coefficient $\beta = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^3/\text{с}$

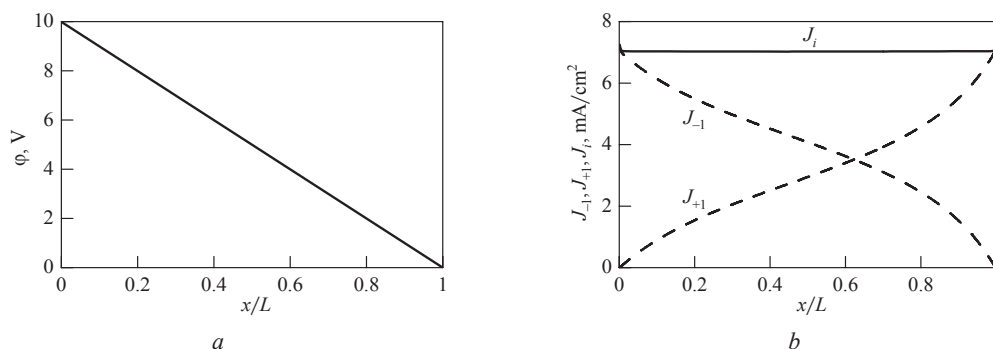


Рис. 3. Зависимость электрического потенциала φ (a), а также плотностей ионных токов J_{-1} , J_{+1} и $J_i = J_{-1} + J_{+1}$ (b) от координаты x при напряжении на электродах $U = 10$ В и коэффициенте генерации ионов $\beta = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{s}$ в решетке

Fig. 3. Dependence of the electric potential φ (a) as well as ion current densities J_{-1} , J_{+1} and $J_i = J_{-1} + J_{+1}$ (b) on the x coordinate at the electrode voltage $U = 10$ V and the ion generation coefficient $\beta = 1.5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{s}$ in the lattice

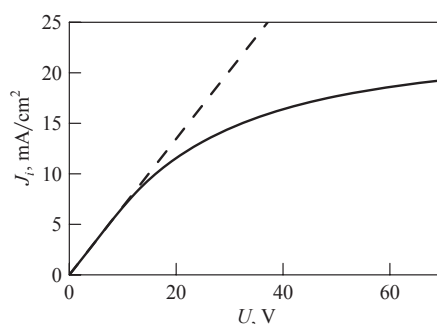


Рис. 4. Зависимость плотности полного ионного тока J_i от напряжения U на электродах при коэффициенте генерации ионов $\beta = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{s}$. Штриховая линия – закон Ома

Fig. 4. Dependence of the total ion current density J_i on the electrode voltage U at the ion generation coefficient $\beta = 1.5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{s}$. The dashed line is Ohm's law

от анода в направлении катода. Следовательно, вклад в потенциал от нескомпенсированных ионов в решетке согласно уравнению (11) меньше потенциала от внешнего источника напряжения. На рис. 3, b показаны распределения плотностей ионных токов $J_{-1}(x)$ и $J_{+1}(x)$, а также суммарной плотности ионного тока $J_i(x) = J_{-1}(x) + J_{+1}(x)$ вдоль решетки при $U = 10$ В.

Ключевой величиной, представляющей интерес для экспериментальных исследований по рассчитанной схеме генерации OH^0 и H_2 на электродах, является плотность стационарного ионного тока. Рассмотрим поведение системы при изменении параметров, которые легко можно изменять на эксперименте. Изменяя разность потенциалов U на электродах при фиксированных остальных параметрах, получим зависимость плотности полного ионного тока в решетке от напряжения $J_i(U) = J_{-1}(x, U) + J_{+1}(x, U)$, т. е. вольт-амперную характеристику, представленную на рис. 4. Видно, что при увеличении разности электрических потенциалов $U > 15$ В между анодом и катодом происходит замедление увеличения плотности тока J_i из-за ограниченного количества ионов и конечных значений их дрейфовых подвижностей и коэффициентов диффузии в решетке.

Заключение. В диффузионно-дрейфовом приближении построена модель прыжковой миграции ионов OH^- и H^+ по междоузлиям двумерной квадратной решетки с электрическими контактами. Учтена генерация этих ионов при диссоциации электрически нейтральных молекул воды и рекомбинация ионов с образованием молекул воды. Получены распределения для концентраций ионов, плотностей ионных токов и электрического потенциала. Предложена схема получения гидроксильных радикалов OH^0 на аноде и атомарного водорода на катоде. Численное решение дифференциальных уравнений, описывающих генерацию, рекомбинацию и миграцию противоположно заряженных ионов, проводилось с помощью аппроксимации исходных уравнений разностными аналогами и построения итерационного процесса. На основе предложенной модели получены численные значения плотностей ионных токов.

Благодарности. Работа выполнена в рамках программ «Физматтех» и «Конвергенция-2020» Республики Беларусь, а также Рамочной программы Европейского Союза по развитию научных исследований и технологий Horizon2020 (грант № H2020-MSCA-RISE-2015-690968 NANOGUARD2AR).

Acknowledgements. The work was supported by the Belarusian National Research Programs “Fizmattekh”, “Convergence-2020”, and by the European Union Framework Programme for Research and Innovation Horizon 2020 (Grant No. H2020-MSCA-RISE-2015-690968 NANOGUARD2AR).

Список использованных источников

1. Sources and cycling of tropospheric hydroxyl radicals – An overview / Y. Elshorbany [et al.] // *Z. Phys. Chem.* – 2010. – Vol. 224, № 7/8. – P. 967–987. <https://doi.org/10.1524/zpch.2010.6136>
2. The effect of pH on OH radical generation in aqueous solutions by atmospheric pressure glow discharge / A. Khlyustova [et al.] // *Plasma Chem. Plasma Process.* – 2016. – Vol. 36, № 5. – P. 1229–1238. <https://doi.org/10.1007/s11090-016-9732-3>
3. H2020 projects with Belarus participations retained for funding (by February 2019) [Электронный ресурс] // Нац. информ. офис программ ЕС по науке и инновациям в Беларуси. – 2019. – Режим доступа: <http://fp7-nip.org.by/ru/hor20/BelPr>. – Дата доступа: 07.06.2019.
4. Quantum chemical calculation of reactions involving C_{20} , C_{60} , graphene and H_2O / N. A. Poklonski [et al.] // *Int. J. Nanosci.* – 2019. – Vol. 18, № 3/4. – P. 1940008 (5 pp.). <https://doi.org/10.1142/S0219581X19400088>
5. Richards, P. M. Correlated hopping conductivity in a general two sublattice structure / P. M. Richards // *J. Chem. Phys.* – 1978. – Vol. 68, № 5. – P. 2125–2128. <https://doi.org/10.1063/1.436034>
6. Hao, T. Conductivity equations of protons transporting through 2D crystals obtained with the rate process theory and free volume concept / T. Hao, Y. Xu, T. Hao // *Chem. Phys. Lett.* – 2018. – Vol. 698. – P. 67–71. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.02.059>
7. Fishman, S. N. The diffusion of ions across biological membranes / S. N. Fishman, M. V. Volkenstein // *J. Membr. Biol.* – 1973. – Vol. 12, № 1. – P. 189–192. <https://doi.org/10.1007/BF01869999>
8. Volgin, V. M. Ionic transport through ion-exchange and bipolar membranes / V. M. Volgin, A. D. Davydov // *J. Membr. Sci.* – 2005. – Vol. 259, № 1. – P. 110–121. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2005.03.010>
9. Неоднородный перенос заряда через биологические мембраны / П. М. Булай [и др.] // *Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика.* – 2008. – № 1. – С. 3–7.
10. Ho, M.-W. Water is the means, medium and message of life / M.-W. Ho // *Int. J. Des. Nat. Ecodyn.* – 2014. – Vol. 9, № 1. – P. 1–12. <https://doi.org/10.2495/DNE-V9-N1-1-12>
11. Саркисов, Г. Н. Структурные модели воды / Г. Н. Саркисов // *Успехи физ. наук.* – 2006. – Т. 176, № 8. – С. 833–845. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0176.200608b.0833>
12. Шмелев, В. М. Распространение электрического разряда по поверхности воды и полупроводника / В. М. Шмелев, А. Д. Марголин // *Теплофизика высоких температур.* – 2003. – Т. 41, № 6. – С. 831–838.
13. Березин, Ю. А. Метод расщепления для задач физики полупроводников / Ю. А. Березин, Н. Н. Яненко // *Докл. Акад. наук СССР.* – 1984. – Т. 274, № 6. – С. 1338–1340.
14. Полупроводниковый диод с прыжковой миграцией электронов по точечным дефектам кристаллической матрицы / Н. А. Поклонский [и др.] // *Докл. Нац. акад. наук Беларуси.* – 2017. – Т. 61, № 3. – С. 30–37.
15. Poklonski, N. A. Quasiclassical description of the nearest-neighbor hopping dc conduction via hydrogen-like donors in intermediately compensated GaAs crystals / N. A. Poklonski, S. A. Vyrko, A. G. Zabrodskii // *Semicond. Sci. Technol.* – 2010. – Vol. 25, № 8. – P. 085006 (6 pp.). <https://doi.org/10.1088/0268-1242/25/8/085006>
16. Poklonski, N. A. Model of hopping dc conductivity via nearest neighbor boron atoms in moderately compensated diamond crystals / N. A. Poklonski, S. A. Vyrko, A. G. Zabrodskii // *Solid State Commun.* – 2009. – Vol. 149, № 31/32. – P. 1248–1253. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2009.05.031>
17. Wardle, B. Principles and applications of photochemistry / B. Wardle. – Chichester: Wiley, 2009. – xiv+250 p.
18. Koryta, J. Principles of electrochemistry / J. Koryta, J. Dvořák, L. Kavan. – Chichester: Wiley, 1993. – xvi+486 p.
19. Allnatt, A. R. Atomic transport in solids / A. R. Allnatt, A. B. Lidiard. – Cambridge: Cambridge University Press, 2003. – xxiv+572 p.
20. Mason, E. A. Transport properties of ions in gases / E. A. Mason, E. W. McDaniel. – New York: Wiley, 1988. – xiv+560 p. <https://doi.org/10.1002/3527602852>
21. Silbey, R. J. Physical chemistry / R. J. Silbey, R. A. Alberty, M. G. Bawendi. – New York, Wiley, 2005. – viii+944 p.
22. Тонконогов, М. П. Диэлектрическая спектроскопия кристаллов с водородными связями. Протонная релаксация / М. П. Тонконогов // *Успехи физ. наук.* – 1998. – Т. 168, № 1. – С. 29–54. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0168.199801b.0029>
23. Kondepudi, D. Modern thermodynamics. From heat engines to dissipative structures / D. Kondepudi, I. Prigogine. – Chichester: Wiley, 2015. – xxvi+523 p.

References

1. Elshorbany Y., Barnes I., Becker K. H., Kleffmann J., Wiesen P. Sources and cycling of tropospheric hydroxyl radicals – An overview. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 2010, vol. 224, no. 7–8, pp. 967–987. <https://doi.org/10.1524/zpch.2010.6136>
2. Khlyustova A., Khomyakova N., Sirotkin N., Marfin Yu. The effect of pH on OH radical generation in aqueous solutions by atmospheric pressure glow discharge. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 2016, vol. 36, no. 5, pp. 1229–1238. <https://doi.org/10.1007/s11090-016-9732-3>

3. *H2020 projects with Belarus participations retained for funding (by February 2019)*. Available at: <http://fp7-nip.org/ru/hor20/BelPr> (accessed 07 June 2019).
4. Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A., Vlassov A. T., Hieu N. N. Quantum chemical calculation of reactions involving C_{20} , C_{60} graphene and H_2O . *International Journal of Nanoscience*, 2019, vol. 18, no. 3–4, pp. 1940008 (1–5). <https://doi.org/10.1142/S0219581X19400088>
5. Richards P. M. Correlated hopping conductivity in a general two sublattice structure. *The Journal of Chemical Physics*, 1978, vol. 68, no. 5, pp. 2125–2128. <https://doi.org/10.1063/1.436034>
6. Hao T., Xu Y., Hao T. Conductivity equations of protons transporting through 2D crystals obtained with the rate process theory and free volume concept. *Chemical Physics Letters*, 2018, vol. 698, pp. 67–71. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.02.059>
7. Fishman S. N., Volkenstein M. V. The diffusion of ions across biological membranes. *The Journal of Membrane Biology*, 1973, vol. 12, no. 1, pp. 189–192. <https://doi.org/10.1007/BF01869999>
8. Volgin V. M., Davydov A. D. Ionic transport through ion-exchange and bipolar membranes. *Journal of Membrane Science*, 2005, vol. 259, no. 1, pp. 110–121. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2005.03.010>
9. Bulay P. M., Molchanov P. G., Cherenkevich S. N., Afanasenkov D. S., Pitlik T. N. Heterogeneous charge transfer across biological membranes. *Vestn. BGU. Ser. 1. Fizika. Matematika. Informatika = Vestnik BSU. Series 1: Physics. Mathematics. Informatics*, 2008, no. 1, pp. 3–7 (in Russian).
10. Ho M.-W. Water is the means, medium and message of life. *International Journal of Design & Nature and Ecodynamics*, 2014, vol. 9, no. 1, pp. 1–12. <https://doi.org/10.2495/DNE-V9-N1-1-12>
11. Sarkisov G. N. Structural models of water. *Physics-Uspekhi*, 2006, vol. 49, no. 8, pp. 809–820. <https://doi.org/10.1070/PU2006v049n08ABEH005824>
12. Shmelev V. M., Margolin A. D. Propagation of an electric discharge over the surface of water and semiconductor. *High Temperature*, 2003, vol. 41, no. 6, pp. 735–741. <https://doi.org/10.1023/B:HITE.0000008327.80183.0e>
13. Berezin Yu. A., Yanenko N. N. Separation method for problems in semiconductor physics. *Soviet Physics. Doklady*, 1984, vol. 29, no. 2, pp. 109–110.
14. Poklonski N. A., Kovalev A. I., Vyrko S. A., Vlassov A. T. Semiconductor diode with hopping migration of electrons via point defects of crystalline matrix. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2017, vol. 61, no. 3, pp. 30–37 (in Russian).
15. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskiy A. G. Quasiclassical description of the nearest-neighbor hopping dc conduction via hydrogen-like donors in intermediately compensated GaAs crystals. *Semiconductor Science and Technology*, 2010, vol. 25, no. 8, pp. 085006 (1–6). <https://doi.org/10.1088/0268-1242/25/8/085006>
16. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskiy A. G. Model of hopping dc conductivity via nearest neighbor boron atoms in moderately compensated diamond crystals. *Solid State Communications*, 2009, vol. 149, no. 31–32, pp. 1248–1253. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2009.05.031>
17. Wardle B. *Principles and Applications of Photochemistry*. Chichester, Wiley, 2010. xiv+250 p.
18. Koryta J., Dvořák J., Kavan L. *Principles of Electrochemistry*. Chichester, Wiley, 1993. xvi+486 p.
19. Allnatt A. R., Lidiard A. B. *Atomic Transport in Solids*. Cambridge, Cambridge University Press, 2003. xxiv+572 p.
20. Mason E. A., McDaniel E. W. *Transport Properties of Ions in Gases*. New York, Wiley, 1988. xiv+560 p. <https://doi.org/10.1002/3527602852>
21. Silbey R. J., Alberty R. A., Bawendi M. G. *Physical Chemistry*. New York, Wiley, 2005. viii+944 p.
22. Tonkonogov M. P. Dielectric spectroscopy of hydrogen-bonded crystals, and proton relaxation. *Physics-Uspekhi*, 1998, vol. 41, no. 1, pp. 25–48. <https://doi.org/10.1070/PU1998v041n01ABEH000328>
23. Kondepudi D., Prigogine I. *Modern Thermodynamics. From Heat Engines to Dissipative Structures*. Chichester, Wiley, 2015. xxvi+523 p. <https://doi.org/10.1002/9781118698723>

Інфармацыя аб аўтарах

Поклонскі́й Николай Александрович – доктор фізіка-матэматычных навук, прафесар, Беларускі дзяржаўны ўніверсітэт (пр. Незавісímасці, 4, 220030, г. Мінск, Рэспубліка Беларусь). E-mail: poklonski@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-0799-6950>

Бурый Артем Олегович – магістрант, Беларускі дзяржаўны ўніверсітэт (пр. Незавісímасці, 4, 220030, г. Мінск, Рэспубліка Беларусь). E-mail: BuryAO@bsu.by

Абрашина-Жадаева Наталья Григорьевна – доктор фізіка-матэматычных навук, дацэнт, Беларускі дзяржаўны ўніверсітэт (пр. Незавісímасці, 4, 220030, г. Мінск, Рэспубліка Беларусь). E-mail: zhadaeva@bsu.by

Вырко Сергей Александрович – кандыдат фізіка-матэматычных навук, старэйшы навуцны супрацоўнік, Беларускі дзяржаўны ўніверсітэт (пр. Незавісímасці, 4, 220030, г. Мінск, Рэспубліка Беларусь). E-mail: vyrko@bsu.by

Information about the authors

Nikolai A. Poklonski – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: poklonski@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-0799-6950>

Artsiom A. Bury – Master Student, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: BuryAO@bsu.by

Natalia G. Abrashina-Zhadaeva – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: zhadaeva@bsu.by

Sergey A. Vyrko – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vyrko@bsu.by